

ミュオン顕微鏡を水素プローブとして用いるためのシミュレーション研究

| | |
|-------|---|
| 著者 | 斎藤 峰雄 |
| 著者別表示 | Saito Mineo |
| 雑誌名 | 平成27(2015)年度 科学研究費補助金 新学術領域研究(研究領域提案型) 研究実績の概要 |
| 巻 | 2014-04-01 2016-03-31 |
| ページ | 2p. |
| 発行年 | 2018-03-28 |
| URL | http://doi.org/10.24517/00059942 |



ミュオン顕微鏡を水素プローブとして用いるためのシミュレーション研究

Publicly

All▼

Project Area

Frontier of Materials, Life and Elementary Particle Science Explored by Ultra Slow Muon Microscope

Project/Area Number

26108708

Research Category

Grant-in-Aid for Scientific Research on Innovative Areas (Research in a proposed research area)

Allocation Type

Single-year Grants

Review Section

Science and Engineering

Research Institution

Kanazawa University

Principal Investigator

齋藤 肇雄 金沢大学, 数物科学系, 教授 (60377398)

Project Period (FY)

2014-04-01 – 2016-03-31

Project Status

Completed (Fiscal Year 2015)

Budget Amount *help

¥2,340,000 (Direct Cost: ¥1,800,000, Indirect Cost: ¥540,000)
Fiscal Year 2015: ¥1,170,000 (Direct Cost: ¥900,000, Indirect Cost: ¥270,000)
Fiscal Year 2014: ¥1,170,000 (Direct Cost: ¥900,000, Indirect Cost: ¥270,000)

Keywords

ミュオン / 第一原理計算 / 超微細構造 / 窒化ガリウム / 水素不純物 / ミュオニウム

Outline of Annual Research Achievements

平成28年度は、前年度までの研究で十分でないところを補完するために研究を行った。GaN中で中性のミュオニウムが検出され、超微細構造に強い異方性が現れることが報告されていたが、その原因は未解明であった。これまでに、第一原理計算を実行してミュオンの安定位置を決めており、平成27年度は超微細構造の予備的計算を擬ポテンシャル・平面波法を用いて行った。平成28年度は、擬ポテンシャル・平面波法の計算だけではなく、全電子計算も実行して超微細構造を評価した。とくに、後者の手法は、原子核近傍における電子の波動関数を精密に計算できるため、超微細構造の高信頼性計算に適している。擬ポテンシャル・平面波法と全電子計算の結果を比較することにより、計算の信頼性について議論を行い、計算の妥当性を明らかにした。計算の結果、等方的に超微細構造に影響を与えるフェルミのコンタクト項に関してはSiやGaAsの場合と比べて、値が小さいことが分かった。いっぽう、双極子・双極子相互作用項の計算の結果得られた異方性は、実験結果のものと矛盾しないことを確かめた。このことにより、第一原理計算により、実験結果を再現できる事を明らかにした。3年間の研究により、これまでにその原因が不明であったGaN中ミュオニウムにおける超微細構造の異方性の原因を解明した。そこで得られた知見は、今後の実験研究の進展に有益な情報をもたらすものと考ええる。また、全電子法に基づく第一原理計算が、今後様々な系における超微細構造の解析において有用であることを示した。

Research Progress Status

27年度が最終年度であるため、記入しない。

Strategy for Future Research Activity

27年度が最終年度であるため、記入しない。

Report (2 results)

2015 Annual Research Report

2014 Annual Research Report

Research Products (17 results)

| All | 2017 | 2016 | 2015 | 2014 |
|--|-----------------|--------------|------|--------|
| All | Journal Article | Presentation | | |
| [Journal Article] Spin-Polarized First-Principles Calculation of Momentum Densities of Fe | | | | 2017 ▼ |
| [Journal Article] Strain-controlled spin splitting in the conduction band of monolayer WS2 | | | | 2016 ▼ |
| [Journal Article] Density-functional-theory-based calculations of formation energy and concentration of the silicon monovacancy | | | | 2015 ▼ |
| [Journal Article] Magnetism-Driven Electric Polarization of Multiferroic Quasi-One-Dimensional Ca3CoMnO6: First-Principles Study Using Density Functional Theory | | | | 2014 ▼ |
| [Journal Article] Spin polarized positron lifetimes in ferromagnetic metals: First-principles study | | | | 2014 ▼ |
| [Journal Article] Tunable Rashba effect on strained ZnO: First-principles density-functional study | | | | 2014 ▼ |
| [Presentation] GaN中ミュオニウムの超微細構造：第一原理計算 | | | | 2016 ▼ |
| [Presentation] 強磁性体における電子運動量密度の第一原理計算 | | | | 2016 ▼ |
| [Presentation] GaN中ミュオニウムにおける超微細構造の第一原理計算 | | | | 2016 ▼ |

| | |
|--|--------|
| [Presentation] Spin texture of the persistent spin helix on the wurtzite ZnO(10-10)surface:first-principles study | 2015 ▾ |
| [Presentation] First-principles Calculations of Multivacancies in Germanium | 2015 ▾ |
| [Presentation] シリセンにおける水素不純物の電子状態計算 | 2015 ▾ |
| [Presentation] GaN中水素不純物の電子構造計算 | 2015 ▾ |
| [Presentation] 人工超格子(LaAlO ₃) _n /(ATiO ₃) _n (A= Sr, Pb, Ba)における電気分極と電子状態の基板依存性の第一原 | 2014 ▾ |
| [Presentation] ashba effect on clean and hydrogenated ZnO(10-10)non-polar surface:First-principles study | 2014 ▾ |
| [Presentation] Band gap of polythiophene derivatives:First-principles study | 2014 ▾ |
| [Presentation] Vibrational Effect on the Concentration of Silicon Monovacancies | 2014 ▾ |

URL: